

平成 23 年度日本鉱物科学会研究奨励賞
第 10 回受賞者

小松一生会員（東京大学大学院理学系研究科）

対象業績：「高圧下その場 X 線・中性子回折による含水素物質の構造決定に関する研究」



推薦理由：

小松一生会員は水素原子を構造中に含む物質の極限環境下における挙動を、先端的かつ独自の結晶学的・分光学的手法を駆使して解明してきた。特に高圧条件下での精密な結晶構造解析では、国際的に評価の高い業績をあげている。

含水鉱物の高圧下での構造変化に関する研究では、小松会員はアルミニウム水酸化物及び含水アルミニウム珪酸塩などの高圧下での挙動から、多くの新事実を見出ししてきた。例えば、水酸化アルミニウム(ギブサイト)の常温高圧下の多形である η 相と δ 相の結晶構造およびその相転移機構の全容を解明することに成功した。この研究は、ありふれた含水鉱物であり多くの先行研究がありながら未解明であったギブサイトの高圧相の構造を解明した点や、非常に複雑な構造でありながら X 線回折・ラマン散乱・分子動力学法の高度な融合によって高い信頼性を持って解析がなされた点などが高く評価され、世界で最も歴史のある結晶学専門誌である *Zeitschrift für Kristallographie* 誌の表紙を飾った。また、アルミニウム珪酸塩であるトパーズの研究では、高圧下・高温下その場赤外・ラマン分光実験と高圧粉末中性子回折実験の結果から、特異な水素結合の振る舞いとその発現機構を解明した。

高圧下での中性子実験技術の開発に関しては、小松会員はエジンバラ大学に博士研究員として滞在中に、3 GPa を超える高圧力下での単結晶中性子回折測定による結晶構造解析に世界で初めて成功し、到達圧力範囲を 10 GPa にまで高めた。また、同圧力下において 40 K 程度までの低温下でも単結晶中性子回折の測定に成功し、氷の高圧相や各種ハイドレート、強い水素結合をもつ強誘電体等の構造解析へ道を開いた。J-PARC パルス中性子源に建設中

の高圧中性子ビームライン計画において、小松会員は概念設計の段階から中心的な役割を果たし、国内では初めてとなる 17 GPa までの超高圧下中性子回折実験を成功させ、その解析法も確立した。

実験室における高圧下 X 回折に関する研究では、小松会員は従来放射光を用いなければ不可能であった高圧下における単結晶・粉末 X 線回折を、実験室で利用可能な X 線光源を用いることで実現することに成功した。特に単結晶 X 線回折では独自に開発した高圧セルによって、極めて高い精度での構造解析を可能とした。小松会員が開発した装置環境を用いることにより、今後は放射光のビームタイムに制約されることなく、高圧下 X 線回折実験が行えるようになり、より多様な物質・条件での物質科学の進展が期待される。

このように小松一生会員は地球・惑星物質科学、特に高圧下での結晶学の分野で先導的な研究業績を挙げ、今後もさらなる飛躍が期待される気鋭の研究者である。よって、小松会員を日本鉱物科学会研究奨励賞受賞者として相応しいと認め推薦する。

小松一生会員の主要論文

1. K. Komatsu, T. Kuribayashi, Y. Kudoh and H. Kagi (2007) Crystal structures of high-pressure phases in the alumina-water system: I. Single crystal X-ray diffraction and molecular dynamics simulation of η -Al(OH)₃. *Zeitschrift für Kristallographie*, 222, 1-12
2. C. Bull, M. Guthrie, J. Archer, M-T. Fernandez-Diaz, J. Loveday, K. Komatsu, H. Hamidov, R. Nelmes (2011) High-pressure single-crystal neutron diffraction to 10 GPa by angle-dispersive techniques, *Journal of Applied Crystallography*, 44, 831-838.
3. K. Komatsu, H. Kagi, T. Yasuzuka, T. Koizumi, R. Iizuka, K. Sugiyama, Y. Yokoyama (2011) A design of backing seat and gasket assembly in diamond anvil cell for accurate single crystal x-ray diffraction to 5 GPa, *Review of Scientific Instruments*, 82, 105107.